Perturbacija

Ivo Krajnik

14. maj 2008

1 Naloga

Izračunaj popravek energije osnovnega stanja atoma z vrstnim številom Z in enim samim elektronom zaradi končne velikosti jedra. Predpostavi, da je

1. naboj jedra enakomerno razporejen po celotni prostornini jedra.
2. naboj jedra samo na površini jedra.

2 Rešitev

Lastna stanja in lastne energije Hamiltonjana, ki opisuje interakcijo elektrona s točkastim jedrom poznamo. Nas posebej zanima osnovno stanje in osnovna energija, oziroma njen popravek, če Hamiltonjan za malo spremenimo. Vedno lahko Hamiltonjan zapišemo kot

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \delta\hat{H}_0,$$

Kjer Hamiltonjan $\hat{H}_0$ ustreza osnovnemu sistemu, katerega lastne rešitve poznamo,

$$\hat{H}_0\psi_n = E_n\psi_n.$$

Če velja,

$$\left\langle\psi_n\left|\delta\hat{H}_0\right|\psi_m\right\rangle \ll \left\langle\psi_n\left|\delta\hat{H}_0\right|\psi_n\right\rangle = \delta E_n \quad \forall m \neq n,$$

potem lahko v prvem približku pišemo popravek,

$$E_n = E_n + \delta E_n.$$

Kot rečeno, nas zanima le osnovno stanje in osnovna energija,

$$\begin{aligned} \psi_{1,0} &= 2\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a}}, \\ E_1 &= -\frac{Z^2 e_0^2}{8\pi\epsilon_0 a}, \end{aligned}$$

kjer je a Bohr-ov radij, $a = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/me_0^2$. Osnovno stanje je od kota neodvisno, $m = 0$.

2.1 Enakomerno razporejen naboj

Če je naboj porazdelejen enakomerno po volumnu krogle s polmerom R, potem je jakost električnega polja na razdalji $r < R$ enaka:

$$E = \frac{Ze_0}{4\pi\epsilon_0}\frac{r}{R^3}.$$

Potencialno energijo na celotnem območju,

$$V(r) = \int_\infty^r e_0 E(r) dr,$$

torej zapišemo kot:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze_0^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{3}{R} - \frac{r^2}{R^3}\right) & \text{za } r < R, \\ -\frac{Ze_0^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r} & \text{za } r \geq R. \end{cases}$$

Nas v resnici zanima le popravek k potencialni energiji točkastega jedra,

$$\delta\hat{H}_0 = \begin{cases} \frac{Ze_0^2}{4\pi\epsilon_0}\left[\frac{1}{r} - \frac{1}{2R}\left(3 - \frac{r^2}{R^2}\right)\right] & \text{za } r < R, \\ 0 & \text{za } r \geq R. \end{cases}$$

Kot rečeno, dobimo popravek k energiji osnovnega stanja z integralom,

$$\delta E_1 = \frac{Ze_0^2}{\pi\epsilon_0}\left(\frac{Z}{a}\right)^3 \int_0^R r^2 \left[\frac{1}{r} - \frac{1}{2R}\left(3 - \frac{r^2}{R^2}\right)\right] e^{-\frac{2Zr}{a}} dr.$$

Ni smiselno zapisat nepregleden rezultat, raje zapišimo prvi neničelni člen v razvoju popravka energije osnovnega stanja po R,

$$\delta E_1 = \frac{2Z^4 e_0^2}{5\pi\epsilon_0 a^3} R^2.$$

Saj razumemo, da je $R \ll a/Z$.

2.2 Naboj na površini

Če je naboj porazdeljen na lupini s polmerom R potem je jakost električnega polja znotraj te lupine enaka nič. Potencialno energijo lahko hitro zapišemo,

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze_0^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{R} & \text{za } r < R, \\ -\frac{Ze_0^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r} & \text{za } r \geq R. \end{cases}$$

Nas seveda zanima le popravek k potencialni energiji osnovnega sistema,

$$\delta\hat{H}_0 = \begin{cases} \frac{Ze_0^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{1}{r} - \frac{1}{R}\right) & \text{za } r < R, \\ 0 & \text{za } r \geq R. \end{cases}$$

Na osnovi tega pa popravek k osnovni nergiji,

$$\delta E_1 = \frac{Ze_0^2}{\pi\epsilon_0}\left(\frac{Z}{a}\right)^3 \int_0^R r^2 \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{R}\right) e^{-\frac{2Zr}{a}} dr.$$

Ponovno razvijemo popravek po R do prvega neničelnega člena,

$$\delta E_1 = \frac{2Z^4 e_0^2}{3\pi\epsilon_0 a^3} R^2.$$